MA8020 Tekniska beräkningar

Något om felanalys och datoraritmetik

Mikael Hindgren

HÖGSKOLAN I HALMSTAD

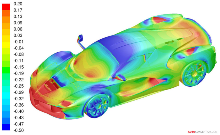
8 november 2024

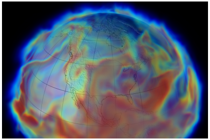
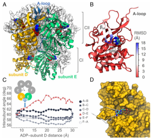
Numeriska beräkningar

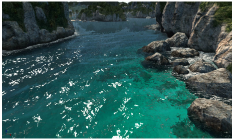
Varför? Man vill matematiskt modellera fysikaliska problem som t.ex.

- Strömningsmekanik inom bil- och flygindustrin
- Klimat- och vädersimuleringar
- Molekylberäkningar inom bioteknik och läkemedelsdesign
- Animationer inom film- och spelindustrin

Modellerna blir snabbt för komplicerade för att kunna lösas analytiskt!





Fördelar jämfört med verkliga experiment:

- Kräver ingen dyr experimentell utrustning
- Vid utveckling kan prototyputvecklingsfasen minskas
- Man kan modellera/simulera processer som inte går att utföra experimentellt

OBS! En fysikalisk/matematisk modell är alltid en förenklad bild av verkligheten!

Numeriska metoder och numerisk analys

Numerisk metod:

- En algoritm ($=$ följd av regler) som löser ett kontinuerligt (oändligt) matematiskt problem med ett ändligt antal aritmetiska operationer $(+, -, \cdot, /)$
- Ger en approximativ lösning

Numerisk analys:

- Konstruktionen av numeriska metoder genom att ersätta matematikens oändliga processer med ändliga processer
- Metoderna analyseras med avseende på noggrannhet

Numeriska metoder och numerisk analys

Numeriska beräkningar är aldrig exakta $\Rightarrow$ Felanalys är centralt:

- Före beräkningen:
  - Vilken noggrannhet krävs?
  - Avvägning: Beräkningstid vs felstorlek
  - Välj metod som ger lagom stort fel
- Efter beräkningen:
  - Felets storlek: Vilken noggrannhet (antal gällande siffror) har utdata?

Numeriska beräkningar/simuleringar:

1. Förenkla problemet (approximera) så att det kan lösas med dator
2. Analysera lösningsmetoden för att bestämma felet i resultatet
3. Välj parametrar i lösningsmetoden för att nå önskad noggrannhet och beräkningstid

Felkällor vid numeriska beräkningar

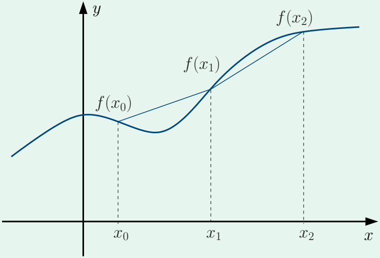
Exempel 1

Vi vill beräkna en integral med hjälp av en tabell med funktionsvärden:

$$I = \int_0^1 f(x)dx$$

x	0.20	0.40	0.60	0.80	1.00
$f(x)$	1.75	1.92	1.56	1.36	0.85

Trapetsmetoden: Approximera $f(x)$ styckvis med räta linjer och beräkna arean under linjerna.



$$I = \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \approx A = h\left(\frac{f(x_0)}{2} + f(x_1) + \frac{f(x_2)}{2}\right), \quad h = x_i - x_{i-1}$$

Vilka felkällor finns?

Felkällor vid numeriska beräkningar

Data → Matematiskt problem → Numerisk metod → Approximativ lösning

Definition 1

Resultatets olika felkällor klassificieras enligt följande:

- R_X: Fel i indata:
  - R_{XF}: Fel som orsakats av felaktiga funktionsvärden
  - R_{XX}: Fel som orsakats av andra fel i indata
- R_B: Avrundningsfel pga ändligt, fixt antal siffror
- R_T: Trunkeringsfel pga att “oändlig process ersätts med ändlig”

Totala felets storlek:

$$|R_{\text{Tot}}| \leq |R_{XF}| + |R_{XX}| + |R_B| + |R_T|$$

Det är viktigt att kunna uppskatta hur stora felen i en beräkning är!

Felkällor vid numeriska beräkningar

Exempel 1 (forts)

Resultatet blir

$$I \approx A = 0.2\left(\frac{1.75}{2} + 1.92 + 1.56 + 1.36 + \frac{0.85}{2}\right) = 1.228 \approx 1.2$$

Felkällor:

- Funktionen $f(x)$ approximeras med räta linjer. Detta ger ett trunkeringsfel

  $$|R_T| = |I - A|$$

  Felet bör bero på $f(x)$ och på steglängden h.
- Felaktiga tabellvärden $f(x_k)$ ger ett fel R_{XF}.
- Slutavrundning av svaret ger ett fel R_B.

Hur ska vi uppskatta felens storlek?

Felkällor vid numeriska beräkningar

Definition 2

Låt x^* beteckna exakta värdet och x ett närmevärde till x^*:

- Absolut fel: $\epsilon_a = |\Delta x| = |x^* - x|$
- Relativt fel: $\epsilon_r = \dfrac{|\Delta x|}{|x^*|} \approx \dfrac{|\Delta x|}{|x|} \leftarrow$ om inte x^* är känd
- Om $\epsilon_a \leq 0.5 \cdot 10^{-t}$ så har x t korrekta decimaler
- Heltalssiffrorna (förutom inledande 0:or) och de korrekta decimalerna är signifikanta siffror

Exempel 2

$$\begin{aligned} x^* &= \sqrt{2} = 1.41421356... \approx x = 1.41 \\ \Rightarrow |\Delta x| &= 0.00421356... < 0.005 = 0.5 \cdot 10^{-2} \end{aligned}$$

$\therefore x = 1.41$ har 2 korrekta decimaler och 3 signifikanta siffror.

Felkällor vid numeriska beräkningar

Mer om totalt fel

Antag att

- $f^*(x^*)$ beskriver ett fenomen exakt (det man vill beräkna)
- f är funktionen som beräknas i datorn och x är mätvärdet (approximationer till f^* resp. x^*)

$$\Rightarrow R_{\text{Tot}} = f(x) - f^*(x^*) = (f(x) - f^*(x)) + (f^*(x) - f^*(x^*)) = e_B + e_D$$

- Beräkningsfel $e_B = R_B + R_T$ uppstår då datorn evaluerar värdet.
- Datafel $e_D = R_X$ uppstår pga fel i mätinstrument.

Beräkningsalgoritmen påverkar inte datafelet!

Felfortplantning

Problem: Vi vill beräkna $f(x^*)$ då vi endast känner ett närmevärde x. Hur skall vi uppskatta felet

$$|\Delta f| = |f(x^*) - f(x)|\,?$$

Sats 1 (Medelvärdessatsen)

Om $f(x)$ är deriverbar finns det ett tal ξ mellan x^* och x sådant att

$$f(x^*) - f(x) = f'(\xi)(x^* - x) = f'(\xi)\Delta x.$$

Om Δx är litet är $f'(\xi) \approx f'(x)$ dvs

$$|\Delta f| \lesssim |f'(x)||\Delta x| \quad \leftarrow \text{ Maximalfelsuppskattningen}$$

Exempel 3

Vi vill beräkna $f(x) = \sqrt{x}$ då $x = 3.05 \pm 0.01$

$$\begin{aligned} |\Delta f| \lesssim |f'(x)||\Delta x| &= \frac{1}{2\sqrt{x}}|\Delta x| \le \frac{0.01}{2\sqrt{3.05}} = 0.002862991\ldots \le 0.003 \\ \Rightarrow \sqrt{3.05} &= 1.746 \pm 0.003 \end{aligned}$$

Felfortplantning

Resultatet kan generaliseras till flera variabler:

Definition 3

Om $f(x_1, x_2, ..., x_n)$ är deriverbar och om endast närmevärden

$$x_k = x_k^* + \Delta x_k, \quad k = 1, 2, ..., x_n,$$

är kända så är Maximalfelsuppskattningen:

$$|\Delta f| \lesssim \left|\frac{\partial f}{\partial x_1}\right| |\Delta x_1| + \cdots + \left|\frac{\partial f}{\partial x_n}\right| |\Delta x_n|$$

Anm: Maximalfelsuppskattningen ger en mycket pessimistisk feluppskattning om antalet variabler är stort. Det finns lämpligare sätt att uppskatta felet i sådana fall.

Felfortplantning vid aritmetriska operationer

Sats 2

Låt x_1 och x_2 vara närmevärden till x_1^* och x_2^*. Då gäller:

- $y = x_1 \pm x_2 \Rightarrow |\Delta y| \leq |\Delta x_1| + |\Delta x_2|$
- $y = x_1 \cdot x_2$ *eller* $y = \dfrac{x_1}{x_2} \Rightarrow \left|\dfrac{\Delta y}{y}\right| \leq \left|\dfrac{\Delta x_1}{x_1}\right| + \left|\dfrac{\Delta x_2}{x_2}\right|$

Exempel 4

Med $x_1 = 101 \pm 1$ och $x_2 = 100 \pm 1$ får vi:

$$
\begin{aligned}
y &= x_1 + x_2 = 201, \quad |\Delta y| \leq |\Delta x_1| + |\Delta x_2| = 2 \Rightarrow y = 201 \pm 2 \\
y &= x_1 \cdot x_2 = 10100, \quad \left|\frac{\Delta y}{y}\right| \leq \left|\frac{\Delta x_1}{x_1}\right| + \left|\frac{\Delta x_2}{x_2}\right| \\
&= \frac{1}{101} + \frac{1}{100} = 0.019901... \\
\Rightarrow |\Delta y| &= 10100 \cdot 0.019901... = 201 \Rightarrow y = 10100 \pm 201
\end{aligned}
$$

$\therefore$ 1% respektive 2% maximalfel i beräkningsresultatet.

Kancellation

Vid subtraktion av två nästan lika stora tal x_1 och x_2 uppstår en noggrannhetsförlust som kallas kancellation.

Exempel 5

Ekvationen $x^2 - 20x + 1 = 0$ har rötterna $x_{1,2} = 10 \pm \sqrt{99}$. Antag att vi känner $\sqrt{99}$ med 4 korrekta decimaler. Hur noggrant kan rötterna bestämmas?

$$
\begin{aligned}
x_1 &= 10 + \sqrt{99} = 10 + 9.9499 \pm 0.5 \cdot 10^{-4} = 19.9499 \pm 0.5 \cdot 10^{-4} \\
x_2 &= 10 - \sqrt{99} = 10 - 9.9499 \pm 0.5 \cdot 10^{-4} = 0.0501 \pm 0.5 \cdot 10^{-4}
\end{aligned}
$$

$\therefore$ 6 respektive 3 (!) signifikanta siffror.
Förlängning med konjugatet undviker kancellation:

$$x_2 = \frac{(10 - \sqrt{99})(10 + \sqrt{99})}{(10 + \sqrt{99})} = \frac{1}{10 + \sqrt{99}} = \frac{1}{19.9499 \pm 0.5 \cdot 10^{-4}}$$

Kancellation

Exempel 5 (forts)

Vi har

$$\frac{1}{19.9499} = 0.050125564...$$

Regeln för felfortplantning vid division ger relativa felet ($\epsilon_r = \frac{|\Delta y|}{|y|}$) i närmevärdet till x_2 som kommer från felet i närmevärdet till $\sqrt{99}$:

$$\epsilon_r = \frac{0.5 \cdot 10^{-4}}{19.9499} = 2.50627... \cdot 10^{-6} < 0.3 \cdot 10^{-5}$$

Absoluta felet:

$$\epsilon_r \cdot |x_2| < 0.3 \cdot 10^{-5} \cdot 0.050125564... = 1.50376... \cdot 10^{-7} < 0.5 \cdot 10^{-6}$$

$$\Rightarrow x_2 = 0.050125 \pm 0.5 \cdot 10^{-6}$$

6 korrekta decimaler och 5 signifikanta siffror!

Kancellation

Exempel 6

Vi har

$$f(x) = \frac{1-\cos x}{\sin x} = \frac{(1-\cos x)(1+\cos x)}{\sin x(1+\cos x)} = \frac{\sin^2 x}{\sin x(1+\cos x)} = \frac{\sin x}{1+\cos x}$$

För små x är $\cos x \approx 1$ och vi får kancellation i det första uttrycket men inte i det sista. Undvik kancellation genom omskrivning.

Matematiskt ekvivalenta uttryck är inte alltid numeriskt ekvivalenta!

Kancellation kan ofta undvikas med Taylorutveckling. För små x är t ex:

$$1-\cos x \approx 1 - \left(1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{4!}\right) = \frac{x^2}{2} - \frac{x^4}{4!}$$

Talrepresentation i datorer

Heltal kan representeras exakt i en dator (om ordlängden räcker till).

Hur ska vi representera godtyckliga reella tal?

- Ett reellt tal kan skrivas som ett fyttal (dvs på exponentiell form):

$$
\begin{aligned}
763.45 &= 7.6345 \cdot 10^{2} \\
\frac{\pi}{16} &= 0.19634954084936 20\ldots = 1.9634954084936 20\ldots \cdot 10^{-1}
\end{aligned}
$$

- Ett flyttal kallas normaliserat om det endast finns en siffra ($\neq 0$) framför decimalpunkten.
- Talet $7.6345 \cdot 10^2$ har heltalsdelen 7 och bråkdelen 0.6345. Detta betyder

$$
(7 \cdot 10^{0} + 6 \cdot 10^{-1} + 3 \cdot 10^{-2} + 4 \cdot 10^{-3} + 5 \cdot 10^{-4}) \cdot 10^{2}
$$

- Vi har alltså ett positionssystem med basen 10.

Hur ser datorns flyttalssystem ut?

Talrepresentation i datorer

Definition 4

Ett flyttalssystem karakteriseras av parametrar (β, t, L, U), där β är talsystemets bas, t är antalet siffror i bråkdelen, och L och U är systemets minsta respektive största exponent.

Exempel 7

Talsystemet $(10, 3, -9, 9)$ innehåller exempelvis talen

$$4.562 = 4.562 \cdot 10^0, \quad 123.7 = 1.237 \cdot 10^2 \quad \text{och} \quad 0.006532 = 6.532 \cdot 10^{-3}.$$

Talet 0 kan inte skrivas som ett normaliserat flyttal.

Flyttal

Varje reellt tal $x \neq 0$ avkortat till $t + 1$ siffror kan framställas i basen β på formen

$$x = \pm r \cdot \beta^N$$

där $r = d_0.d_1 d_2 ... d_t$, $d_0 \neq 0$, kallas taldelen (eller mantissan) och heltalet N exponentdelen.

Talrepresentation i datorer

IEEE 754 Binary32 (Enkel precision): $(2, 23, -126, 127)$

I datorn lagras talet som ett ord (32 bitar). Bitarna fördelas enligt

s (1 bit)	e (8 bitar)	f (23 bitar)

- I normalfallet, $1 \leq e \leq 254$, gäller att flyttalet skall tolkas som

$$x = (-1)^s (1.f)_2 \cdot 2^{e-127}$$

- $e = 0$ eller $e = 255$ ger möjlighet att definiera $x = 0$, $x = \pm\infty$, och $x = \text{NaN}$.
- Systemet kan representera tal mellan approximativt 10^{-40} och 10^{40}.

Exempel 8

Hur lagras talet 12.39 i datorn?

$$(12.39)_{10} = 1.54875 \cdot 2^3 = (-1)^0 (1.10001100011110101110000)_2 \cdot 2^{130-127}$$

$$\Rightarrow s = 0,\ e = (130)_{10} = (10000010)_2,\ f = (10001100011110101110000)_2$$

$$\underbrace{\underbrace{\boxed{0}}_{s}\ \underbrace{\boxed{1}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{1}\boxed{0}}_{e}\ \underbrace{\boxed{1}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{1}\boxed{1}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{1}\boxed{1}\boxed{1}\boxed{1}\boxed{0}\boxed{1}\boxed{0}\boxed{1}\boxed{1}\boxed{1}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{0}}_{f}}_{\text{32 bitar}}$$

Talrepresentation i datorer

OBS! Då vi lagrar $x = 0.1$ i flyttalssystemet $(2, 23, -126, 127)$ får vi

$$\begin{aligned} x = (0.1)_{10} &= (0.0001100110011001100110011001100110011001100...)_2 \\ &= (1.1001100110011001100110011001100110011001100...)_2 \cdot 2^{-4} \end{aligned}$$

Med 23 bitar i bråkdelen blir inte $x = 0.1$ lagrat exakt i datorn.
Vi får ett avrundningsfel:

$$|x^* - x| \leq 2^{-27} = 7.45 \cdot 10^{-9}$$

Är det viktigt?

Ett tal som kan lagras exakt i det decimala talsystemet kan inte säkert lagras exakt i det binära.

Felen är små men datorer kan göra många beräkningar snabbt.

Anm: Reella tal kan inte alltid representeras exakt i en dator:
$\sqrt{2} = 1.4142135623...$ $\leftarrow$ irrationellt tal med oändligt antal decimaler

- Matematiskt: $\sqrt{2} \cdot \sqrt{2} = 2$
- I datorn: $\sqrt{2} \cdot \sqrt{2} \neq 2$